



TITLE:

統計力学(最終回)(講義ノート)

AUTHOR(S):

久保, 亮五

---

CITATION:

久保, 亮五. 統計力学(最終回)(講義ノート). 物性研究 1965, 4(3): 187-204

ISSUE DATE:

1965-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85743>

RIGHT:

統計力学 (最終回)

久保亮五 (東大理)

IV Fluctuation-Dissipation Theorem

§ 24. Brownian motion と Fluctuation-dissipation theorem

古典的な Langevin eq. を

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -ru + f(t) \\ f(t) &= F(t)/m\end{aligned}\tag{24.1}$$

とかこう。  $r$  は抵抗係数,  $F(t)$  は random force である。  $F(t)$  が

$$\langle u(t_1) F(t_2) \rangle = 0 \quad t_2 > t_1 \tag{24.2}$$

なる条件、即ち、random force はそれ以前の  $u$  に関係ないことを仮定すれば (24.1) から

$$\langle \dot{u}(t) u(0) \rangle = -r \langle u(t) u(0) \rangle \quad t > 0 \tag{24.3}$$

が得られるから

$$\langle u(t) u(0) \rangle = \langle u^2 \rangle e^{-rt} \tag{24.4}$$

が知れる。

この Brownian particle に外力, たとえば  $eE$  ( $e$  は電荷,  $E$  は電場の強さ) が加わった場合、運動方程式が

$$\dot{u} = -ru + f(t) + K(t) \tag{24.5}$$

であるとしよう。一般的にいえば、 $r$  や  $f$  が外力によつて影響されることだつてあり得るが、外力  $K$  があんまり大きくない限り、linear な effect を問題にする範囲では、この仮定は許されるであろう。特に外力が

久保亮五

$$K(t) = \mathcal{R}e K_0 e^{i\omega t} \quad (24.6)$$

のように周期的であれば、それに対する  $u$  のレスポンスは (24.5) の平均をとつて、

$$\langle u(t) \rangle = \mathcal{R}e \frac{K_0}{r + i\omega} e^{i\omega t} = \mathcal{R}e \sigma(\omega) K_0 e^{i\omega t} \quad (24.7)$$

となる。但し、random force について当然

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad (24.8)$$

が仮定されている。ここに平均はもちろん、random force のあらゆる可能性についての平均である。“conductivity”  $\sigma(\omega)$  は

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{r + i\omega} \quad (24.9)$$

で定義されているが、(24.4) からわかるように、

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\langle u^2 \rangle} \int_0^\infty \langle u(0) u(t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (24.10)$$

という関係が成立っている。特に energy dissipation をあらわす  $\mathcal{R}e \sigma$  については、

$$\mathcal{R}e \sigma(\omega) = \frac{1}{\langle u^2 \rangle} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \langle u(0) u(t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (24.11)$$

$$= \frac{1}{2\langle u^2 \rangle} G_u(\omega) \quad (24.12)$$

が成立つ。ここに  $G_u(\omega)$  は、(9.7), (9.10) で定義された  $u$  の power spectrum である。

一方、(24.1) から、 $G_u$  は  $f$  の power spectrum とは、(11.3),

$$G_u = \frac{1}{\omega^2 + r^2} G_f \quad (24.13)$$

によつて結ばれている。これを (24.12) に入れると

$$r = \frac{1}{2 \langle u^2 \rangle} G_f \quad (24.14)$$

が得られる。

(24.10) は次節に述べるように、一般に成立つ関係で、conductivity のような admittance が流れの相関函数で与えられることを示す。(24.12) はその定理の一部分であるが、energy-dissipation を表わす係数 ( $\mathcal{R}e \sigma$ ) が 外力がない場合でのその系の自然のゆらぎとしての  $u$  の power spectrum で与えられることを言うものである。これが一般に Fluctuation-dissipation theorem とよばれる定理である。

(24.14) は、この定理の別な表現といつてもよいが、抵抗係数  $r$  と、random force  $f$  との関係である。この簡単な話では、 $r$  は一定としているが、それと話が矛盾しないためには、random force  $f$  は white noise をもたねばならない。従つてまた、 $f(t)$  の相関函数は

$$\langle f(t_1) f(t_2) \rangle = 2r \langle u^2 \rangle \delta(t_1 - t_2) \quad (24.15)$$

の形でなければならない。

(24.15) は Niquist が熱雑音について最初に示した関係で、Niquist の定理とよばれている。これは Fluctuation-dissipation theorem (24.12) の別な表現といつてよい。実際、(24.1) の運動方程式によつて (24.12) を、力  $f$  の correlation で表現したのが (24.14), すなわち (24.15) である。

特に、この粒子がほんとうに Brown 運動、つまり熱平衡にある媒質の中にあるとすれば、

$$\langle u^2 \rangle = \frac{kT}{m}$$

したがつて、(24.15) は

$$\langle f(t_1) f(t_2) \rangle = \frac{2r kT}{m} \delta(t_1 - t_2) \quad (24.16)$$

これは (11.9) で既に示したところである。

上の考察をもつと一般的に拡張しよう。Langevin eq. を拡張する方向は大

## 久保亮五

きくわけて二つある。一つは(a)抵抗係数の同波数依存性を含めること、もう一つは(b)非線型への拡張である。(b)は大へん興味深く、又重要でもあるが、その問題は別な機会にゆずつて、ここでは(a)を考える。

これはまた、理論的にもぜひ必要なことである。 $u(t)$ が random process として stationary であれば

$$\frac{d}{d\tau} \langle u(t_1 + \tau) u(t_2 + \tau) \rangle = 0 \quad (24.17)$$

であるから、特に

$$\langle \dot{u} u \rangle = 0 \quad (24.18)$$

がでる。ところで、(24.3) は

$$\lim_{t \rightarrow 0} \langle \dot{u}(t) u(0) \rangle = -r \langle u^2 \rangle \neq 0$$

を示している。これは、(24.4) が  $t \rightarrow 0$  では成立たないこと、すなわち、充分短い時間については、Langevin eq. (24.1) が何らかの修正を要することを意味する。

そこで、抵抗係数  $r$  が時間に依るものと考えて、(24.1), (24.5) を

$$\dot{u}(t) = -\int_0^t r(t-t') u(t') dt' + f(t) + K(t)/m \quad (24.19)$$

のように修正する。ここに  $K(t)$  は外力、 $f(t)$  は random force である。後者については (24.2) と (24.8), すなわち

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad (24.20a)$$

$$\langle u(t_1) f(t_2) \rangle = 0 \quad t_1 < t_2 \quad (24.20b)$$

を仮定する。この仮定によつて、 $K(t) = 0$  なら

$$\langle u(t) \rangle = 0 \quad (24.21)$$

が保証される。また

$$\frac{d}{dt} \langle u(t) u(0) \rangle = - \int_0^t r(t-t') \langle u(t') u(0) \rangle dt' \quad (24.22)$$

となるから

$$\int_0^t \langle u(t) u(0) \rangle e^{-i\omega t} dt = \frac{\langle u^2 \rangle}{i\omega + r(\omega)} \quad (24.23)$$

が得られる。ここに

$$r(\omega) = \int_0^\infty e^{-i\omega t} r(t) dt \quad (24.24)$$

である。一方、 $K$  が週期的である場合、(24.19)から

$$\langle u(t) \rangle = \frac{K}{m \{ i\omega + r(\omega) \}} e^{i\omega t}$$

が強制振動の解として得られるから、conductivity  $\sigma$  は

$$\sigma = \frac{1}{m} \frac{1}{i\omega + r(\omega)} \quad (24.25)$$

(24.23)と照らし合せて再び (24.10)

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\langle u^2 \rangle} \int_0^\infty \langle u(0) u(t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (24.26)$$

が成立つことを知る。さらに、(24.14)あるいは(24.15)が

$$r(\omega) = \frac{1}{\langle u^2 \rangle} \int_0^\infty \langle f(0) f(t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (24.27)$$

の形に一般化されることも次のようにして証明される。 $K=0$ の場合の一般化されたLangevin eq. (24.19) を

$$f(t) = \dot{u}(t) + \int_0^t r(t-t') u(t') dt' \quad (24.28)$$

とかけば

$$\langle f(t) f(0) \rangle = \langle (\dot{u}(t) + \int_0^t r(t-t') u(t') dt') \cdot \dot{u}(0) \rangle \quad (24.29)$$

ここで

久保亮五

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle \dot{u}(t) \dot{u}(0) \rangle dt \\
 &= i\omega \langle u^2 \rangle + \omega^2 \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle u(t) u(0) \rangle dt \\
 &= \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} dt \int_0^t r(t-t') \langle u(t') \dot{u}(0) \rangle dt' \\
 &= r[\omega] \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle u(t) \dot{u}(0) \rangle dt \\
 &= -r[\omega] \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle \dot{u}(t) u(0) \rangle dt \\
 &= r[\omega] \{ \langle u^2 \rangle - i\omega \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle u(t) u(0) \rangle dt \}
 \end{aligned}$$

なることに注意すれば、(24.29) は

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} \langle f(t) f(0) \rangle dt \\
 &= (i\omega + r[\omega]) \{ \langle u^2 \rangle - i\omega \langle u^2 \rangle \sigma(\omega) \} = \langle u^2 \rangle r[\omega]
 \end{aligned}$$

を与える。

ここに述べた一般化は必ずしも唯一のものではないかもしれない。たとえば (24.19) の代りに

$$\dot{u}(t) = - \int_{-\infty}^t r(t-t') u(t') dt' + f(t) + K(t) \quad (24.30)$$

とおくことも考えられよう。相違は何を random force とするか、それに対ししてどれだけの条件をおくかであるが、(24.30) よりも (24.19) の方が簡単である。

(24.27) は前に述べた Niquist の定理よりもひろい内容をもっている。後に後に述べるように、一般の力学の方程式が (24.19) に相当する形に書直されることは森氏によつて示されている。これは大変重要なことに思われる。

一方、(24.19) の右辺のように、系に加わる力を、systematic な外力  $K$ ，systematic な抵抗力，それと random force  $f$  に分けることの意味は何で

あろうか。以上の議論からすれば、その解釈は (24.20a, b) の仮定と、その平均の意味、それにここに仮定された線型性の中に含まれているわけである。

## § 25. Linear Response Theory

一般に、熱平衡にある系にある外力を加え、これに対する response としてその系のある物理量を観測するとき、外力があまり大きくない限り、response と力との関係は線型であつて、その係数が一般的な意味での admittance としてこの線型関係を記述する。この admittance に対して (24.10) のような関係式が一般に成立することを以下に示そう。

いま、考える系のハミルトニアンが

$$\mathcal{H}_t = \mathcal{H}(p, q) - A(p, q) F(t) \quad (25.1)$$

なる形に与えられたとしよう。 $\mathcal{H}(p, q)$  は外力がないときの非摂動ハミルトニアン、 $F(t)$  は外力、 $A$  はそれに共軛な量である。古典的な分布函数  $f(p, q, t)$  は Liouville eq.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\mathcal{H}_t', f) \quad (25.2)$$

に従う。ここに  $(\ , \ )$  は Poisson カッコを表わす。(25.2) を

$$\frac{\partial f}{\partial t} = i\mathcal{L}f - F(t)(A, f) \quad (25.3)$$

と記す。 $i\mathcal{L}$  は unperturbed Liouville operator, 第2項は外力による運動である。熱平衡分布を

$$f_0 = C e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (25.4)$$

とし、 $f$  を

$$f = f_0 + f'$$

とおいて、 $f'$  を  $F$  の一次まで求めるとすれば、(25.3) は



久保亮五

$$\frac{\partial f'}{\partial t} = i\mathcal{L}f' - F(t)(A, f_0) \quad (25.5)$$

となるから、これを積分して

$$f' = -\int_{-\infty}^t e^{i\mathcal{L}(t-t')} (A, f_0) \cdot F(t') dt' \quad (25.6)$$

を得る。ここに

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} F(t) = 0$$

を仮定した。

(25.6) は簡単な意味をもっている。時刻  $t$  で外力がデルタ函数,  $\delta(t-t')$  として与えられると、そのための分布函数の変化は

$$\delta_f = -(A, f_0)$$

となる。この変化はそれ以後  $e^{i\mathcal{L}(t-t')}$  であらわされる自然運動として  $t$  に至る。 $F(t')(-\infty < t' < t)$  に linear な範囲ではこれらを重ね合せばよい。それが (25.6) である。

時刻  $t$  で物理量  $B$  を観測すると、その平衡値

$$B_0 = \int B f_0 d\Gamma$$

( $d\Gamma$  は位相空間での積分) からの外れ  $\Delta B$  は

$$\begin{aligned} \Delta B(t) &= \int B(p, q) f' d\Gamma \\ &= -\int_{-\infty}^t \int d\Gamma B e^{i\mathcal{L}(t-t')} (A, f_0) F(t') dt' \end{aligned} \quad (25.7)$$

で与えられる。これを

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^t \phi_{BA}(t-t') F(t') dt' \quad (25.8)$$

とかけば

$$\phi_{BA}(t) = -\int d\Gamma B e^{i\mathcal{L}t} (A, f_0) \quad (25.9)$$

となる。上に述べたところにより、 $\phi_{BA}(t)$ は $t=0$ で与えられたデルタ型の外力 $F$ に対する $B$ の response である。これを response function とよぶ。

(25.9) はまた  $i\mathcal{L}$  が measure conserving であることに注意して部分積分を行なうことにより ( $\mathcal{L}$  は hermitian)

$$\phi_{BA}(t) = -\int d\Gamma (A, f_0) B(t) \quad (25.10)$$

$$= \int d\Gamma f_0(A, B(t)) \quad (25.11)$$

のようにも表わされる。ここに

$$\begin{aligned} B(t) &= e^{-i\mathcal{L}t} B \\ &= B(p_t, q_t) \end{aligned} \quad (25.12)$$

は

$$p_t = e^{-i\mathcal{L}t} p, \quad q_t = e^{-i\mathcal{L}t} q$$

が Hamilton eq.

$$\begin{aligned} \frac{dp_t}{dt} &= (p_t, H) = -\frac{\partial \mathcal{H}(p_t, q_t)}{\partial q_t} \\ \frac{dq_t}{dt} &= (q_t, H) = \frac{\partial \mathcal{H}(p_t, q_t)}{\partial p_t} \end{aligned}$$

にしたがうことからわかるように、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ による力学量 $B$ の自然運動を意味する。

量子力学的にも上述のことはほとんどそのまま成立つ。分布関数の代りに density matrix  $\rho$  の運動を考えると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, \rho] \\ &= i\mathcal{L}\rho - F(t) \frac{1}{i\hbar} [A, \rho] \end{aligned} \quad (25.13)$$

ここに量子力学的な Liouville operator  $i\mathcal{L}$  は

$$i\mathcal{L}\rho \equiv \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \quad (25.14)$$

久保亮五

で定義される。これに対して

$$e^{i\mathcal{L}t}\rho \equiv e^{\mathcal{M}t/i\hbar}\rho e^{-\mathcal{M}t/i\hbar} \quad (25.15)$$

であることに注意する。

$$\rho_0 = C e^{-\beta\mathcal{M}}$$

$$\rho = \rho_0 + \rho'$$

として (25.13) を  $F$  の一次までで解けば (25.6) に相当して

$$\rho'(t) = - \int_{-\infty}^t e^{-i\mathcal{M}(t-t')/\hbar} \frac{1}{i\hbar} [A, \rho_0] e^{i\mathcal{M}(t-t')/\hbar} F(t') dt' \quad (25.16)$$

となる。 $\beta$  の response  $\Delta B(t)$  はやはり (25.8) の形にかかれる。response function は

$$\phi_{BA}(t) = -\text{Tr} \frac{1}{i\hbar} [A, \rho_0] B(t) \quad (25.17)$$

$$= \text{Tr} \rho_0 [A, B(t)] / i\hbar \quad (25.18)$$

となる。ここに  $B(t)$  は Heisenberg operator

$$B(t) = e^{itH/\hbar} B e^{-itH/\hbar} \quad (25.19)$$

である。

(25.10), (25.11) または (25.17), (25.18) は linear response theory の基礎的關係である。Poisson bracket  $(A, B(t))$  または  $[A, B(t)]/i\hbar$  は、 $t=0$  において  $A$  に共軛な力が  $\delta$ -函数的に働くとき、 $t$  における  $B$  の response を表わすもの、すなわち一種の Einfluss funktion であるから、これを Green 函数 と呼ぶのが近ごろのならわしである。

(25.4) からは直ちに

$$(A, f_0) = -\beta(A, \mathcal{M}) f_0 = -\beta \dot{A} f_0 \quad (25.20)$$

これに対応した量子的な關係は

$$\begin{aligned}\frac{1}{i\hbar} [A, \rho_0] &= \rho_0 \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda\mathcal{H}} \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}, A] e^{-\lambda\mathcal{H}} \\ &= -\rho_0 \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda\mathcal{H}} \dot{A} e^{-\lambda\mathcal{H}}\end{aligned}\quad (25.21)$$

であるから、(25.10)、(25.17) は

$$\phi_{BA}(t) = \beta \int d\Gamma f_0 \dot{A} B(t) = \beta \langle \dot{A}(0) B(t) \rangle \quad (25.22)$$

$$\begin{aligned}\phi_{BA}(t) &= \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \rho_0 e^{\lambda\mathcal{H}} \dot{A} e^{-\lambda\mathcal{H}} B(t) \\ &= \int_0^\beta d\lambda \langle e^{\lambda\mathcal{H}} \dot{A}(0) e^{-\lambda\mathcal{H}} B(t) \rangle\end{aligned}\quad (25.23)$$

の形にかかれる。

特に外力  $F(t)$  が周期的である場合 response を

$$\Delta B(t) = \operatorname{Re} \chi_{BA}(\omega) F_0 e^{i\omega t} \quad (25.24)$$

とにおいて admittance  $\chi_{BA}(\omega)$  を定義すると、 $\chi_{BA}(\omega)$  が

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_0^\infty e^{-i\omega t} \phi_{BA}(t) dt \quad (25.25)$$

で与えられることは明らかである。このようにして、admittance は一般に、熱平衡状態で定義された (25.22) または (25.23) のような相関函数によつて与えられることになる。この定理から、いろいろ重要な一般的な結論が導かれるのであるが、ここではそれには立入らない (R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12 570 (1957), Brittin 編 Lectures in Theoretical Physics vol 1., Interscience, 1959, p.120 等 を参照されたい)。

## § 26. 一般的な Langevin eq. の導出

§ 24 に述べた問題をもういちど、より根本的な立場から考えてみよう。

Brownian particle に働く力は、周囲の粒子からくるもので、運動方程式

$$\frac{du}{dt} = \frac{1}{m} F_t \quad (26.1)$$

久保亮五

に現われる力,  $F_t$  は考えている particle の座標, 運動量のほか, 媒質粒子のそれらを含む非常に複雑なものである。Langevin eq. (24.1) 又はその一般化 (24.19) はこの力を systematic part と random part の二つに分けたものであるが, そのような分離がいつでもできるかは必ずしも明らかではない。

しかし, 熱平衡に近い場合, Brownian particle の速さがあまり大きくはない場合に, 立場を限定すればこれは可能である。それにしても, その分離は, Langevin eq. をどう使うのか, 目的によることである。§ 24 に述べたように, その目的の一つは, ゆらぎと response との関係を明らかにすることにある。これを認識した上で方針を立てるには, 前節の一般論が拠所になる。

(25.23), (25.26) を Brownian particle にあてはめれば,

$$\begin{aligned}\sigma(\omega) &= \frac{1}{i\omega + r(\omega)} \\ &= \int_0^\infty e^{-i\omega t} \int_0^\infty d\lambda \operatorname{Tr} \rho_0 e^{\lambda \mathcal{H}} u(0) e^{-\lambda \mathcal{H}} u(t)\end{aligned}\quad (26.2)$$

(24.23) で

$$\langle u^2 \rangle = kT/m$$

とおき

$$\begin{aligned}\langle u(0) u(t) \rangle &\rightarrow \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \rho_0 e^{\lambda \mathcal{H}} u(0) e^{-\lambda \mathcal{H}} u(t) \\ &= ((u(0) u(t)))\end{aligned}\quad (26.3)$$

のように対応させればもちろん (24.23) は (26.2) に一致する。

ここに便宜のため

$$((A B)) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \rho_0 e^{\lambda \mathcal{H}} A e^{-\lambda \mathcal{H}} B \quad (26.4)$$

を定義した。相関函数のこの定義は古典的な場合には熱平衡分布についての  $AB$  の相関をあらわす。量子的な場合には前節に述べたように, 単なる相関というよりは Green function (あるいは response function) の意味をもつ。

力  $F_t$  を

$$F_t = F_S(t) + F_R(t) \quad (26.5)$$

とかく。 $F_S$  は systematic part,  $F_R$  は random part であるが, “random” とは何を意味するかは, そのようにかかれた Langevin eq. の使い道によつてきめなければならない。§ 24 の議論に大切な条件は (24.20a, b) である。(24.20 b) は (26.3) によつて

$$((u(0) F_R(t))) = 0 \quad (26.6)$$

を意味する。したがつて

$$((u(0) F_t)) = ((u(0) F_S(t))) \quad (26.7)$$

である。

random force に (26.6) の条件を課しただけではこれをどうとるかはきまらないが, (26.1) を Langevin eq. の形, すなわち

$$\dot{u}(t) = -\int_0^t r(t-t') u(t') dt' + \frac{1}{m} F_R \quad (26.7)$$

とかいて, これからすぐに求められる相関函数  $((u(0) u(t)))$  が (24.26) の型をもつことを要求するば, この  $r(t-t')$  は (24.25) に現われた  $r(\omega)$  に当り, また, random force  $f = F_R/m$  は (24.27)

$$r(\omega) = \frac{1}{((u u))} \int_0^\infty ((f(0) f(t))) e^{-i\omega t} dt \quad (26.8)$$

をみたす。

(26.7), (26.8) はこの意味で, 一般公式 (25.26) の別な表現であるが, これをこの形にかくことは  $r(\omega)$  を random force の “correlation” として表わすところに重要性がある。問題はそれでは  $f(t)$  は何かということである。これが与えられれば  $r(\omega)$  が計算でき, admittance  $\sigma$  が知れる。もちろん  $\sigma(\omega)$  は (25.26) を計算することによつても得られ, どちらの計算でも同じ結果になる筈であるが, ちがう表現にはそれぞれの得がある。

森氏は一般の力学量の運動方程式を上のように分離し, 実際に  $f(t)$  の運動法則を与えた (Prog. Theor. Phys. 33 423 (1965)) 以下にその方法の要点

久保亮五

を簡単に述べよう。

少し一般的に力学量として  $p + i\omega q$  のような複素数を頭において考えよう。  
Brown 粒子ばかりでなく、一般的に振動的な量をも考えたいからである。この  
力学量  $A$  の運動方程式を

$$\frac{dA(t)}{dt} = i\mathcal{L}A(t) \quad (26.9)$$

とする。 $i\mathcal{L}$  は Liouville operator , 量子的には

$$i\mathcal{L}A(t) = \frac{1}{i\hbar} [A(t), \mathcal{H}]$$

である。特に  $t=0$  における “速度”  $\dot{A}$  を

$$\frac{dA}{dt} = i\mathcal{L}A = i\hat{\omega}A + \ddot{A} \quad (26.10)$$

とかこう。便宜のため、射影演算子  $P$  を

$$PX = \frac{A((A^*X))}{((A^*A))} \quad (26.11)$$

で定義すると

$$i\hat{\omega}A = P\dot{A}, \quad i\hat{\omega} = \frac{((A^*\dot{A}))}{((A^*A))} \quad (26.12)$$

$$\dot{A}' = (I - P)\dot{A} \quad (26.13)$$

である。

$A(t)$  を

$$A(t) = A_0(t) + A'(t) \quad (26.14)$$

$$A_0(t) = PA(t), \quad A'(t) = (I - P)A(t)$$

のように二つの成分にわけろ。ここに

$$((A^*A_0(t))) = \varepsilon(t)((A^*A)) \quad (26.15)$$

とおけば

$$A_0(t) = \varepsilon(t)A \quad (26.16)$$

である。(26.9) から、 $A_0(t)$ 、 $A'(t)$  の各々に対する運動方程式をつくるためこれに  $P$ 、または  $(I-P)$  を左から作用させる。まず

$$\begin{aligned}
 \frac{dA_0(t)}{dt} &= P \frac{dA(t)}{dt} \\
 &= P i \mathcal{L} A(t) \\
 &= P i \mathcal{L} \{ A_0(t) + A'(t) \} \\
 &= E(t) P i \mathcal{L} A + P i \mathcal{L} A'(t) \\
 \therefore \frac{dA_0(t)}{dt} &= E(t) i \hat{\omega} A + P i \mathcal{L} A'(t) \quad (26.17)
 \end{aligned}$$

また

$$\begin{aligned}
 \frac{dA'(t)}{dt} &= (I-P) i \mathcal{L} \{ A_0(t) + A'(t) \} \\
 &= (I-P) i \mathcal{L} A'(t) + E(t) \dot{A}(0) \quad (26.18)
 \end{aligned}$$

となる。ここで

$$A'(0) = 0$$

に注意して (26.18) を解く。便宜のためラプラス変換を

$$\int_0^\infty e^{-i\omega t} A_0(t) dt = A_0[\omega] \quad (26.19)$$

等のように  $[\omega]$  で表示すると、(26.18) のラプラス変換は

$$\{ i\omega - (I-P) i \mathcal{L} \} A'[\omega] = E[\omega] \dot{A}(0) \quad (26.20)$$

これから

$$A'[\omega] = \frac{1}{i\omega - (I-P) i \mathcal{L}} \dot{A}(0) \quad (26.21)$$

を得る。一方、(26.17) は  $E(t)$  に対する方程式として

$$\frac{dE(t)}{dt} = i \hat{\omega} E(t) + ((A^* P i \mathcal{L} A'(t))) / ((A^* A))$$

このラプラス変換は、 $E(0) = 1$  および (26.21) を考慮して



久保亮五

$$i\omega E[\omega] - I = i\hat{\omega} E[\omega] + E[\omega] ((A^* i\mathcal{L} \frac{1}{i\omega - (I-P) i\mathcal{L}} \dot{A}'(0))) / ((A^* A)) \quad (26.22)$$

これを

$$E[\omega] = \frac{1}{i\omega - i\hat{\omega} + r[\omega]} \quad (26.23)$$

とかく。ただし

$$r[\omega] = -((A^* i\mathcal{L} \frac{1}{i\omega - (I-P) i\mathcal{L}} \dot{A}'(0))) / ((A^* A)) \quad (26.24)$$

とおいた。したがって、(26.21) を用い

$$\begin{aligned} A[\omega] &= A_0[\omega] + A'[\omega] \\ &= E[\omega] \left\{ A + \frac{1}{i\omega - (I-P) i\mathcal{L}} \dot{A}'(0) \right\} \end{aligned}$$

故に (26.23) を入れて、これを

$$\therefore \{i\omega - i\hat{\omega} + r[\omega]\} A[\omega] = A + f[\omega] \quad (26.25)$$

とかくことができる。ただし

$$f[\omega] = \frac{1}{i\omega - (I-P) i\mathcal{L}} \dot{A}'(0) \quad (26.26)$$

とする。(26.25) は微分方程式

$$\frac{dA(t)}{dt} = i\hat{\omega} A(t) - \int_0^t r(t-t') A(t') dt' + f(t) \quad (26.27)$$

と等価である。ただし  $r(t)$  は  $r[\omega]$  のもとの函数、 $f(t)$  も  $f[\omega]$  に対するものである。ところで (26.24) は

$$\begin{aligned} r[\omega] &= ((\dot{A}^*(0) f[\omega])) / ((A^* A)) \\ &= ((\dot{A}^*(0) f[\omega])) / ((A^* A)) \\ &= ((f(0) f[\omega])) / ((A^* A)) \end{aligned} \quad (26.28)$$

を与える。ここに

$$((X \perp Y)) = ((X \dot{Y})) = -((\dot{X} Y))$$

を用い、さらに  $f[\omega]$  に対して (26.26) の定義により

$$((A^* f[\omega])) = 0 \quad (26.29)$$

であることを用いた。(26.28) は

$$r(t) = ((f^*(0) f(t))) / ((A^* A)) \quad (26.30)$$

を意味する。これは (24.27) に相当する。

このようにして実際、運動方程式 (26.9) は一般化された Langevin eq. の形、(26.27) に書かれること、その “random force”  $f(t)$  と “friction”  $r$  は (26.30) の関係にあることが示された。ここで重要な点は  $f(t)$  が (26.29) によつて

$$((A^* f(t))) = 0 \quad (26.31)$$

をみたすことである。この条件により

$$\frac{((A^* A(t)))}{((A^* A))} = E(t) = \frac{1}{i\omega - i\hat{\omega} + r[\omega]}$$

が保証されているようである。

この変形は、random force  $f(t)$  の定義を与えている。(26.26) は

$$\frac{d f(t)}{d t} = (1-P) i \perp f(t) \quad (26.32)$$

$$f(0) = \dot{A}'(0) = (1-P) \dot{A}(0)$$

と等価である。 $f(t)$  の運動は “自然の運動”  $i \perp$  ではない。それを  $A$  に垂直な空間にいつも投影してゆく運動である。

上に言つたように admittance を (26.23) の形にかき、その “抵抗” 係数  $r[\omega]$  を “random” force の correlation として表わすことは、fluctuation dissipation theorem の言換えである。その利点は  $f(t)$  の運動が

久保亮五

どのくらいうまく取扱えるかにかかっている、といつてよいであろう。

森氏はこのような取扱いでひじょうに興味ある具体的な問題を論じ、また近く Progress に発表される別な論文で、perturbation series を連分数の形で表わす一般的な問題とその応用をも論じておられるから参照して頂きたい。

終 り に

この講義では、不可逆過程の統計力学において基本的と私には思われる考え方を、特に古典的なブラウン運動の理論をめぐって述べてきた。一般的な理論としての発展も、具体的な問題への応用も、さらに論じたいことはいろいろあるが、半年の講義時間も終り、このノートも大分長くなつたので、今回をもって終講とする。ノートの準備に協力された研究室の諸氏に感謝する。(完)

1965. 5.22.